



TITLE:

古典粒子系の計算機実験: 計算機の  
発達とともに(物性研究と計算物理  
,研究会報告)

AUTHOR(S):

上田, 顕

---

CITATION:

上田, 顕. 古典粒子系の計算機実験: 計算機の発達とともに(物性研究と  
計算物理,研究会報告). 物性研究 1984, 41(5): 299-311

ISSUE DATE:

1984-02-20

URL:

<http://hdl.handle.net/2433/91191>

RIGHT:

答えてもらう実験とはちがって、コンピューターからはインプットにないものが出てくる筈はない。一方、まさにそこに計算機実験の強味もあるわけである。

いささか筆が迂った気味がある。しかし物性物理における計算機物理は重要な研究分野であり、わが国でも、諸外国でも大きな発展が予想される。20年前とはちがって、今日ではわが国における計算機のファシリティは世界一流だということである。とすれば、世界一流の仕事をするのは研究者の責任であろう。物性物理における計算物理の発展のために、この報告が一つの一里塚となることを期待したい。

## 古典粒子系の計算機実験 —— 計算機の発達とともに ——

京大・工 上 田 顕

### § 1 まえおき

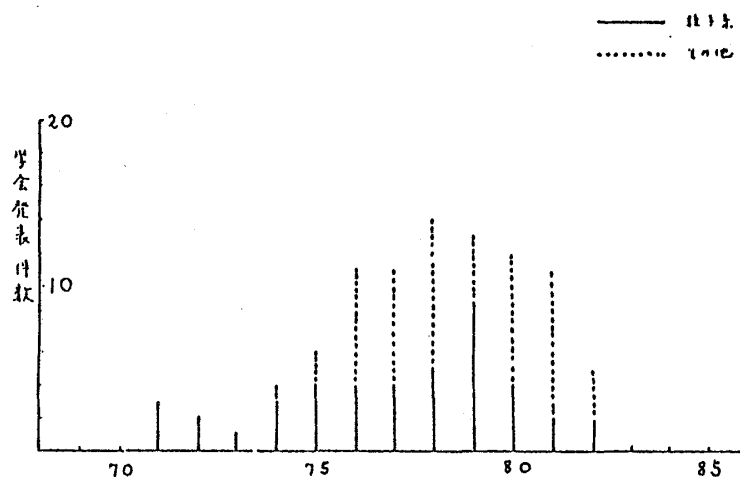
物性理論分野での計算機実験（以下では断らぬ限り「計算機実験」は物性理論分野に限定する）として、筆者はこれまで主に粒子系の分子力学法（MD法）によるシミュレーションを行ってきた。計算機実験は文字通り「実験」であって、実験機器コンピューターの発達とともに、実験の質も量も変化する。実際ここ10年ばかりの間にわれわれの利用できる計算機的能力は著しく増大してきた。

この小論では、(1)国内で行われてきた計算機実験と計算機の発達状況を簡単に振り返り、(2)われわれの計算機実験と計算機とのかかわりを通じて、実験の質的量的変化を例示する。ついで(3)現在行いつつある超イオン導電体のMD法による研究をやや詳しく述べる。最後に(4)並列処理機構をもつ高速計算機がここ2,3年のうちに大型計算機センターなどに設置されるであろうが、その暁に(3)の問題についてどの程度の計算が期待できるか、私見を述べることにする。

### § 2 国内での計算機実験と計算機の発達状況

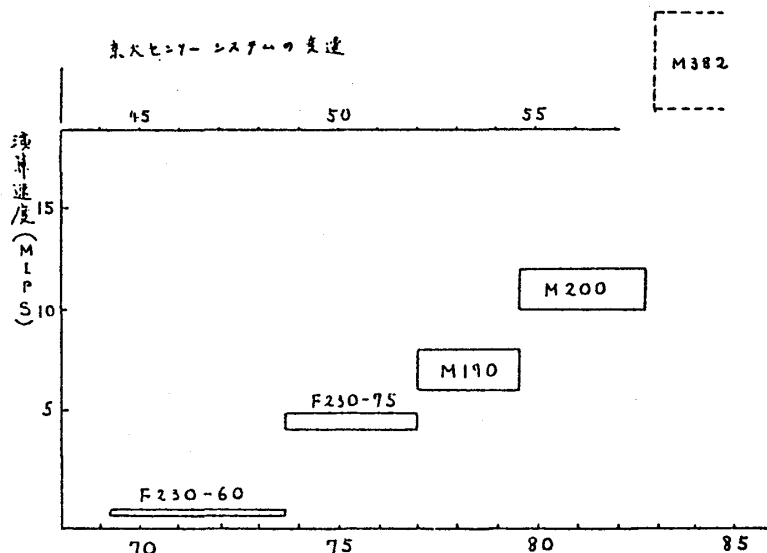
計算機実験が国内で行われるようになったのは、早大グループの非線形格子の問題と<sup>1)</sup>、秩序無秩序現象のシミュレーション<sup>2)</sup>を除けば、70年代に入ってからである。図1に70年から82年までの、物理学会統計力学・物性基礎論分科での計算機実験に関する、毎年の学会発表件数を示す。82年度は春の年会までの件数である。図では粒子系とその他に分けているが、その他

の多くはスピン系であって、ここ2,3年来不規則系が含まれている。70年代前半のほとんどは粒子系の仕事 (soft-core 系<sup>9,12)</sup>, 液体金属<sup>13,14)</sup>)であって、75年から非平衡状態の剛体球形<sup>15)</sup>のシミュレーションがスタートしている。発表件数に消長はあるが、これらの実験は今日まで、東北大、専修大、金沢大、京大などで行われてきた。



粒子系以外の分野の計算機実験は75年頃から始まり、毎年数件の発表があるが、磁性体を含めたスピン系と不規則系が主であって、東北大、原研、筑波大、東大、東工大、日大、名大、京大、阪産大、岡大などで実験が行われてきた。図1で76年以降件数が増大しているのは、次に述べるように、大型計算機センターをはじめとして計算機が新世代と交替する時期に当たっているためと察せられる。

70年は北大から九大まで、7大学に全国共同利用の大型計算機センター(以下大型センターと略称する)が出揃った年である。京大を例にとると(図2参照), 69年4月からシステムF230-60(69年4月-73年8月)によって正式稼動が始まり, F230-75(73年9月-76年12月)を経て, 予算規模が3億7千万円か



ら6億6千万に増額され, M190(77年1月-79年7月)の設置を経て, 現在M200(79年8月-82年8月)が稼動中であるが, 今年9月より2倍強高速のM382に置換えられる。図2の縦軸は計算機の演算速度をMIPS(Million Instruction Per Second)単位で表わしたものである。表1にも各システムの演算速度と計算機利用負担金(CPU処理の秒当り単価)の比較を示す。F230-60とM190を比較すると, 演算速度で9倍, システム全体の処理能力も約9倍となり, またM200と比べると, それぞれ15倍, 25倍となっている。そして同一計算量に対する負担金額は, M200では当初の1/7に減じている。

ところで, F230シリーズ時代は計算需要がシステムの処理能力を圧倒的に越えていた。し

表 1<sup>8)</sup>

機種	MIPS*	計算速度比	負担金(円/秒)	同量の計算に対する負担金の比
230-60	0.7~0.8	1	3.33	1
230-75	4~5	6	10	0.9
M190	6~8	9	10	0.5
M200	10~12	15	7	0.33
M382**	20~25	30	7	0.14
				0.07

\* Million Instruction per Second

\*\* M382 は82年9月から移動する。

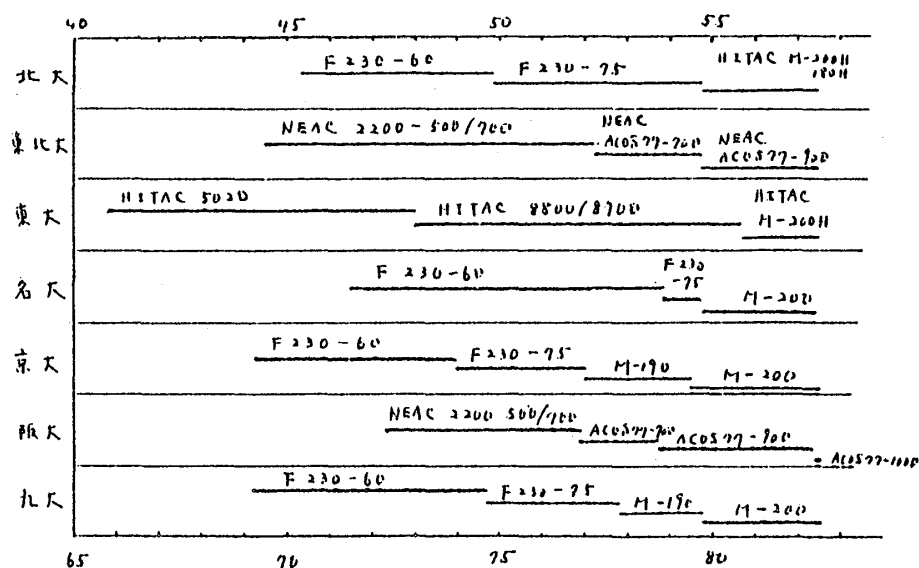


図 3

たがって、長時間計算を必要とする計算機実験を大型センターだけで実行することは、まず不可能に近い状態であった。この状況が改善されたのは、予算規模が約1.8倍に増額されたM190システムに替ってからである。これ以来システムにゆとり（特に年度の前半に）が生じるようになったが、この新世代へのシステムの変更は、各センターともほぼ同時期に行われた。（図3参照）。こうして予算と計算量との兼ね合いで、ある程度の規模の計算機実験ならば、大型センターで実行できるようになったのである。

また統計力学・物性理論と関連の深いプラズマ研究所の共同利用計算機が70年代後半に稼動し始めたこと（77年6月よりM190，79年1月よりM200）も見逃せない。物性理論関係では6グループの人々が、大型センターでは実行できない長時間の計算をプラズマ研究所で行ってきた。79年になると分子科学研究所にも共同利用計算機が設置され、現在M200Hが稼動している。

## § 3 計算の質と量の問題

前節で述べたように、ある程度の規模の計算機実験ならば、大型センターで実行できる情況が生れたと言える。しかし、決してこれで十分ではない。実験の質をあげるには、それなりに計算の規模を拡大しなければならない場合があるが、大型センターでこれを実施しようとする、費用は勿論のこと、1ジョブ当りの計算時間の上限などの種々の制約のために、困難が生じてくる。

具体的に、われわれが行ってきた粒子系の計算機実験について述べよう。単純液体の高密度での構造、動力学的性質、固相・液相転移を特徴づけるのは分子間力の斥力部分であるとの認識のもとに、対ポテンシャル  $\phi_n(r) = \epsilon(\sigma/r)^n$  をもつ soft-core system の計算機実験から始めた。動的性質を調べる目的でMD法による最初の学会報告を行ったのは71年秋であって、このとき系の粒子数  $N=32$ 、運動方程式を差分化して積分したステップ数は、わずかに約250であった。この頃東北大では  $N=864$  の液体金属の計算が行われつつあった。これを海外の研究情況と比べてみると、すでに60年代に Alder, Wainwright らのMD法<sup>3)</sup>、Woodらのモンテカルロ法(MC法)による剛体球系のシミュレーションの主要な計算は完了し、Lennard-Jones(LJ) system についても、Rahman<sup>4)</sup>、ついで Orsay グループ<sup>5)</sup> がMD法で  $N=864$  の系の報告を行っていたのである。溶融塩関係<sup>7)</sup>ではロンドン大学の計算機が熱力学的諸量の計算に活躍していた。soft-core system については、HooverらがMC法での結果を一足先に発表している<sup>6)</sup>。これらの計算は、各自の研究機関に設置された、しかもわが国の計算機より優に1桁は速い計算機を、夜間運転を含めてかなり自由に運用することによって、なされている。

上述の学会報告の計算は京大センターのF230-60で行った。計算需要が処理能力をはるかに越える時代に行ったものであるが、当時の計算機事情の一端を示すものである。

それ以後われわれの行った主要な計算例をテーマ別に表2に示す。この表は1個の熱力学的状態をシミュレートするにあたって、用いた粒子数、運動方程式の積分ステップ数、1ステッ

表 2

研 究 課 題	粒子数	積分ステップ数	CPU時間/ステップ	計算機種
soft-core system の計算機実験 <sup>9)</sup>	32	3000	~ 0.7 秒	F 230-60
	500	3000	~ 3.7	F 230-75
固 液 界 面 の 計 算 機 実 験 <sup>10)</sup>	1600	2000	2.1	M200
固 体 電 解 質 の 計 算 機 実 験 <sup>11)</sup>	108	5000	1.06	M200
	256	5000	5.46	M200

プ当りのCPU時間、用いた機種を示す。N=32のsoft-core systemの計算の一部は、やはり京大センターを利用したのであるが、計算時間が上限20分を越えるため、特殊ジョブの申請を行い、年末の一般受付ジョブ処理の終了直後に、計算処理したものである。N=32の残り、N=108（表にはない）とN=500の計算はすべて理化学研究所の計算機に負っている。

固液界面の計算機実験以来、プラズマ研究所の計算機を利用することになった。この事は計算を効率よく実行する上で、大きく役立っている。とくに長距離力の固体電解質の場合においてそうである。現在の京大センターでは、 $N=108$ の場合、費用を気にしなければ1ジョブとして一気に計算できる。しかし、 $N=256$ の場合には、計算を数ジョブに分割しなければならない。また費用の点でも実行できない。(1データ点当り10万円を越える)

1 データ点を計算するに要する CPU 時間は分子力学法の場合

$$\text{CPU時間} = (\text{積分ステップ数}) \times (\text{粒子数}) \times (\text{力の計算時間})$$

である。このうち

$$\text{力の計算時間} \propto \begin{cases} \text{力の作用距離内の粒子数 (短距離力の場合)} \\ \text{全粒子数} & (\text{長距離力の場合}) \end{cases}$$

である。全粒子数  $N$  とステップ数  $t$  は求める量によって変える必要がある。圧力、内部エネルギーなどの熱力学量ならば、平衡に達してからの  $t \cong$  数百ステップ、 $N \leq 100$  で十分である。時間相関では少い場合で  $t = 1000 \sim 2000$  が必要であって、とくに波数に分けた情報を得ようとする、大きな  $t$ 、 $N$  が必要である。液体の動的構造因子を求めるために、Orsayグループが  $N = 864$  の LJ 系を 10 万ステップ<sup>17)</sup>、 $N = 216$  のイオン系を 5 万ステップ積分した例がある。M200 で同じ計算を行えば、それぞれ  $\sim 32$  時間、 $\sim 54$  時間と推定される。これに加えてフーリエ変換などデータ解析に要する時間も無視できない。分子が剛体でも構造をもつ場合には、角運動量方程式の積分が必要となり、さらにトルクの計算が加わる。モデル化した水では、表 2 の soft-core system にくらべて力とトルクの計算が約 5 倍になる例がある<sup>18)</sup>。

粒子数が多いほどデータの質はよくなる。例として、図4にsoft-core systemの液相での自己拡散係数を $N=32, 108, 500$ の場合に示す。また現象が予想通りにシミュレートされているかどうかは必ず確めなければならない。それにはXY-プロッターを利用するのは有力な方法である。図5, 6は固・液界面をシミュレートし、その粒子の軌跡を示したものである。 $N=1600$ の場合には、液相の粒子の動きは等方的であるが、 $N=368$ では粒子はもっぱらY方向に動いている。これは周期的境界条件の影響がX方向よりY, Z方向に強く現れたためである。図7は超イオン導電体AgIで $I^-$ イオンのbcc格子が融けつつある状態を、 $N=108$ の系について示したものである。短距離力の場合と異り、 $I^-$ のlong range orderがかなり長時間

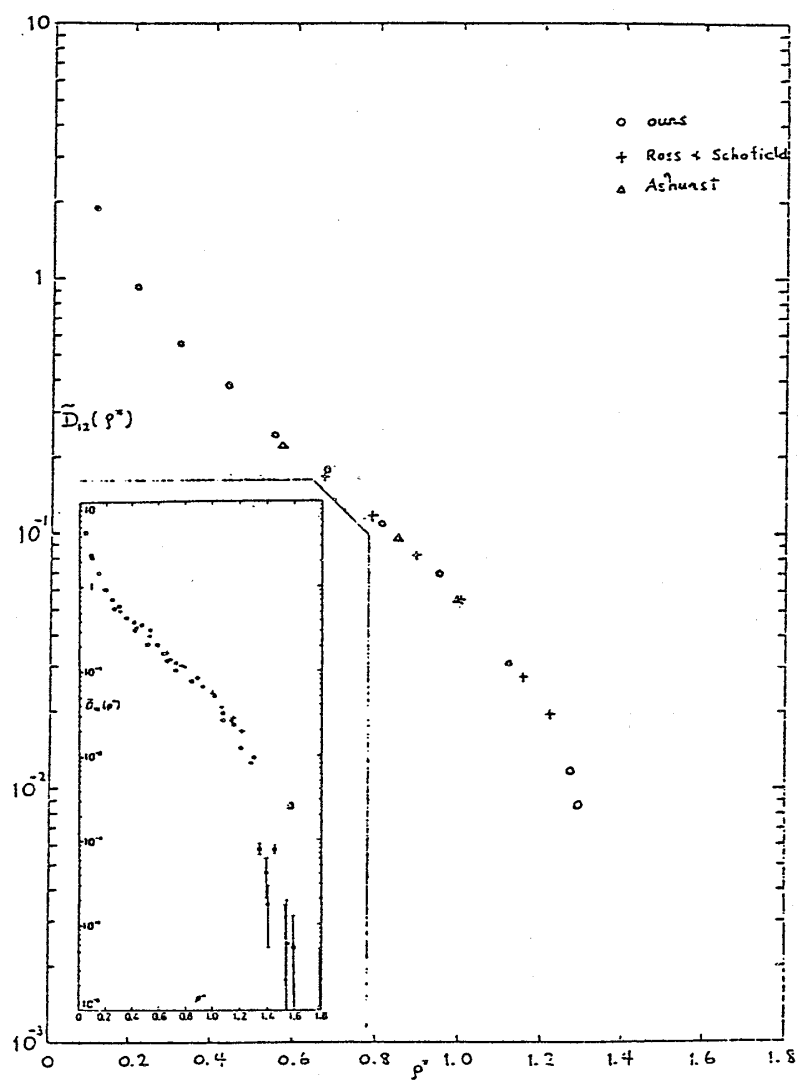


図 4

$N = 368$

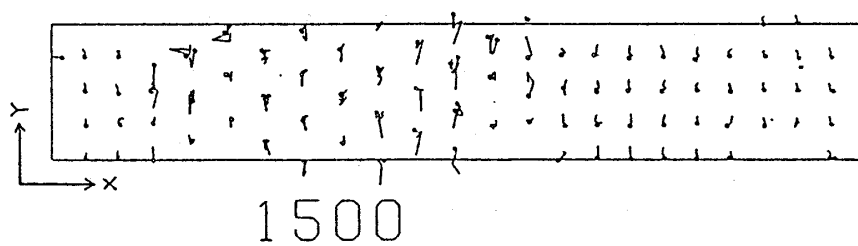


図 5

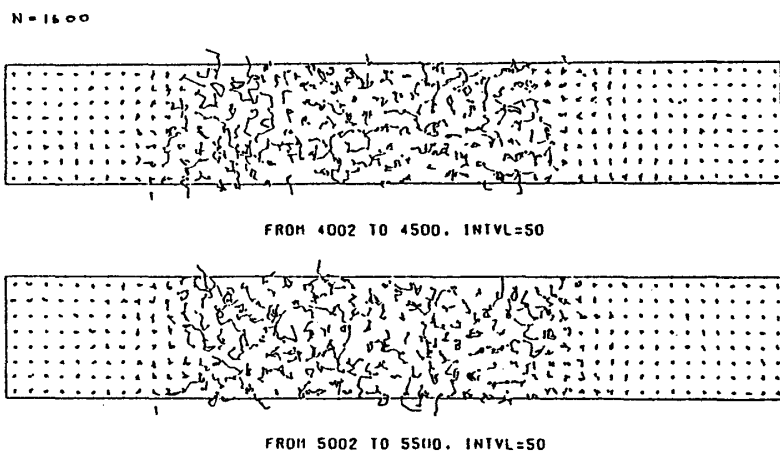


図 6

$t = 800, 1000-5000/30$

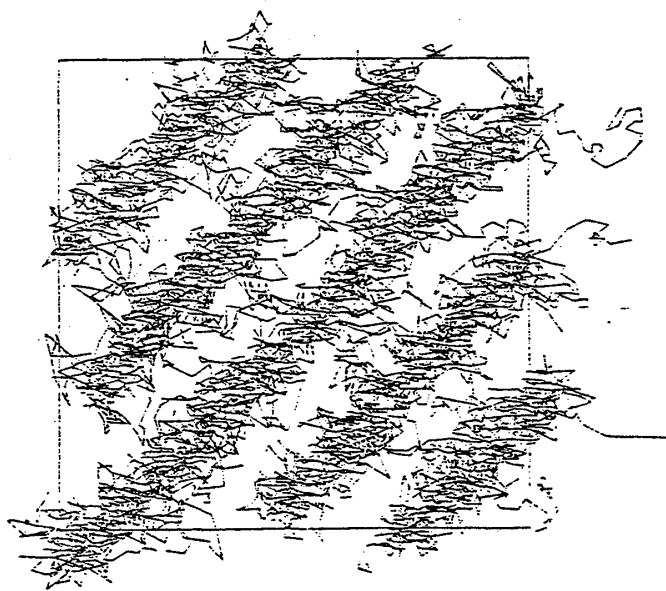


図 7

保たれていることが一見してわかる。しかしクーロン力では周期条件が強く動くから、long range order にその影響がどの程度現われるかは吟味しなければならない。そのためには少くとも  $N = 500$  にはしたいが、計算時間は  $N = 256$  の約 4 倍になる。

#### § 4 超イオン導電体の分子動力的研究

固体電解質の中で高いイオン導電性を示す超イオン導電体 (SIC) は以前より固体物理、化学の分野でよく研究されていたにもかかわらず、あまり研究者の注目をひかなかった。ところ



が1967年、 $\beta$ -アルミナの $\text{Na}^+$ 、 $\text{MAg}_4\text{I}_5$  ( $\text{M}=\text{K}, \text{Rb}, \text{NH}_4$ )の $\text{Ag}^+$ が室温で高い導電性を示すことが発見されてより、いろんな分野への応用が期待されるために、活発に研究が行われるようになった。<sup>21)~23)</sup> 基礎的な問題として、導電性を荷うイオンの電導機構の動力学、絶縁相から超イオン導電性のS I相への移転の機構、これらとイオン間相互作用との関係は興味ある問題である。S I Cの多くはある特定の温度で相転移を起して絶縁相からS I相へ転移するが、その転移の型によって次の3種類に分類される。<sup>20)</sup>

- I. S I相へは、結晶構造の変化を伴って1次転移をする物質。
- II. S I相へ転移の際、結晶構造は変化せず、電導度も連続的温度変化を示し、比熱は2次転移に特徴的な変化をもつ物質。
- III. 明確な転移点をもたず、絶縁相からS I相へ漸次移行する物質。

理論的にはこのような特徴を格子気体モデルなどによる部分格子融解、あるいは秩序—無秩序転移の観点から説明しようとする相転移の現象論、またブラウン運動、跳躍運動、あるいは連続体近似による荷電体の運動のモデル化など、多くの研究が70年代に行われた。<sup>19)</sup> 現状はこのような理論的研究が一段落した段階とみられる。

イオン相互作用とS I Cとの関係を調べるには、MD法は有力な手段であり、また通常の実験では得られない情報を得ることができる。これまで海外で $\text{CaF}_2$ <sup>24, 25, 26)</sup>、 $\text{SrCl}_2$ <sup>27)</sup>、 $\alpha\text{-AgI}$ <sup>29, 30)</sup>、 $\text{CuI}$ <sup>30)</sup>に対してMD法によるシミュレーションが行われているが、用いたイオン間ポテンシャルは相互にかなり異っているため、ポテンシャルの何が効いて実験結果(主に拡散係数)が再現できたのかあまり明らかでない。その最も異なる部分は斥力ポテンシャルにBorn-Mayerの指数関数型<sup>26, 27, 28)</sup>と距離の逆巾のsoft-core型のポテンシャル<sup>29, 30)</sup>のいずれを用いるかにある。物質をAgIに限定すると、Schommers<sup>28)</sup>はクーロンポテンシャルとBorn-Mayer型の斥力ポテンシャル以外に、bcc構造の $\text{I}^-$ イオン格子を安定化させるために、人工的に調和ポテンシャルが各 $\text{I}^-$ イオンに働くとした。これは、Born-Mayer型のあまり強くない斥力だけでは稠密ではないbcc構造を安定化するには不十分なためである。他方VashishtaとRahman (VR)は斥力にsoft-core型を用い、クーロンポテンシャルに加えて、分散力と分極によるポテンシャルを導入している。<sup>29)</sup> どちらのモデルも $\text{Ag}^+$ の拡散係数については実験値を再現しており、さらにVRの求めた $\text{Ag}^+$ の1体分布密度は中性子散乱による結果と一致している。しかし、VRのモデルポテンシャルは4種の項からなる複雑なポテンシャルであるため、bcc構造は、ポテンシャルのどの部分が効いて安定なのか、また $\text{Ag}^+$ の拡散運動はポテンシャルのどんな特徴によっているのか、明らかでない。

われわれは、実験的に知られている $\alpha\text{-AgI}$ の特徴を、できるだけ単純なイオン間ポテンシ

ャルを仮定して統一的に調べる目的で、SICのシミュレーションを始めた。<sup>31, 32, 33)</sup> このために  $i, j$  イオン間の対ポテンシャルとして、

$$\phi_{ij}(r) = \epsilon \left( \frac{\sigma_i + \sigma_j}{r} \right)^n + \frac{z_i z_j (fe)^2}{r} \quad (4.1)$$

を仮定する。この第1項は soft-core 型の斥力であって、 $\sigma_i$  はイオン  $i$  の半径である。 $z_i$  はイオン価、 $f$  はイオン度 (ionicity) を表わすパラメタである。このようなポテンシャルを仮定する根拠は次の点にある。単純液体の動力学的性質、固相・液相相転移は対ポテンシャルの斥力部分に支配され、引力にはあまり依存しないことが、これまでの研究で明らかにされてきた。そして1成分の soft-core system を用いると、逆巾指数  $n$  の相異によって、単純液体 (稀ガス、アルカリ金属、アルカリ土類金属) の物性の特徴が記述される。したがって、AgI のSI相への一次転移を部分格子融解とみる観点からは、斥力ポテンシャルの形は重要な役割を演じることが期待される。この意味で、(4.1) は soft-core ポテンシャルのイオン系への拡張とみなすことができよう。

対ポテンシャル (4.1) をもつ系は興味あるスケール則をもつことを示そう。 $N$  ケのイオンが体積  $V$  を占めるとする。長さ、時間の単位  $\ell, \tau$  を

$$\ell = (V/N)^{1/3}, \quad \tau = \ell (M/\epsilon)^{1/2} (\ell/2\sigma_I)^{n/2} \quad (4.2)$$

( $M, \sigma_I$  は  $I^-$  の質量とイオン半径) で定義して体系のハミルトニアン  $H$  を無次元化したものを  $\tilde{H}$  で表わせば、

$$H = a \tilde{H} \quad (4.3)$$

$$H = \sum_i \frac{\tilde{\mathbf{p}}_i^2}{2m'_i} + \sum_{i>j} \left( \frac{\sigma'_i + \sigma'_j}{\tilde{r}_{ij}} \right)^n + \Gamma \sum_{i>j} \frac{z_i z_j}{\tilde{r}_{ij}} \quad (4.4)$$

の関係が得られる。ここに  $m'_i = m_i/M, \sigma'_i = \sigma_i/\sigma_I$  で、

$$a = \epsilon (2\sigma_I/\ell)^n \quad (4.5)$$

は  $\ell$  だけ離れた  $I^-$  間の斥力ポテンシャルエネルギーである。 $\tilde{H}$  に含まれる  $\Gamma$  は

$$\Gamma = \frac{(fe)^2}{\ell} / a \quad (4.6)$$

で定義され、 $I^-$  間のクーロンエネルギーと斥力ポテンシャルエネルギーの比を表わす。(4.4) は  $n$  と質量比を決めると、重要なパラメタとして  $\Gamma$  とイオン半径の比  $\sigma_{Ag}/\sigma_I$  をもっている。この半径比は、イオン系のみならず2成分系のもつ重要なパラメタである。また  $\Gamma$  は斥力とクーロン力の相対的強さを示すし、(4.1) のポテンシャルパラメタを  $f^2/\epsilon\sigma^n$  の形で含む。したがってこの値が同じでさえあれば、 $f, \epsilon, \sigma$  が個々にどんな値をとってもよい。さらに  $\Gamma$  は

$\ell$  を含むから、密度に代る量である。この  $\Gamma$  と、 $T$  に代る

$$T^* = k_B T / a \quad (4.7)$$

の二つが系の状態変数である。

以上がスケール則の内容であるが、これから次のことが言える。 $\Gamma$  を小さくすると体系は 2 成分 soft-core system に近づき、 $\Gamma$  を大きくすると溶融塩、さらに大きくするとイオン気体になる。したがって、もし S I 相が存在するのであれば、それは  $\Gamma$  のある値の範囲で現われるはずである。具体的計算とその結果の詳細<sup>33)</sup>は省いて、主要な結果だけを述べると：

- (1) 確かに、 $\Gamma$  と温度のある範囲で、「 $I^-$  の bcc 格子が安定で (図 8 参照)、 $Ag^+$  が拡散運動を行う (図 9 参照)」S I 相が現われる (図 10 参照)。 $\Gamma$  の範囲は  $n$ ,  $\sigma_{Ag}/\sigma_I$  に依存するが、 $n = 7$ ,  $\sigma_{Ag}/\sigma_I = 0.29$  では  $1.2 \lesssim \Gamma \lesssim 4$  と予想される。温度を  $kT/\epsilon$  でみると、 $\Gamma$  が大きくなるほど、S I 相の温度領域は高温へずれる。 $\Gamma = 0.99$  では  $I^-$  の bcc 格子は不安定で、より稠密な粒子配置をとる傾向を示している。しかし  $Ag^+$  は拡散運動をする。

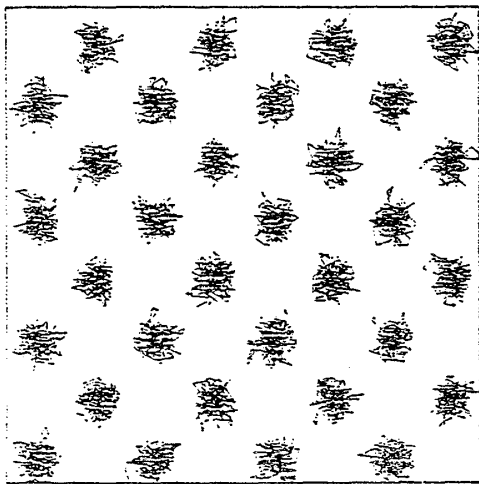


図 8

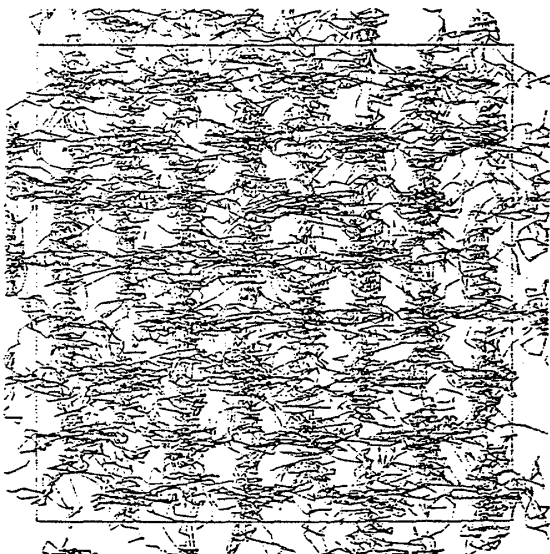


図 9

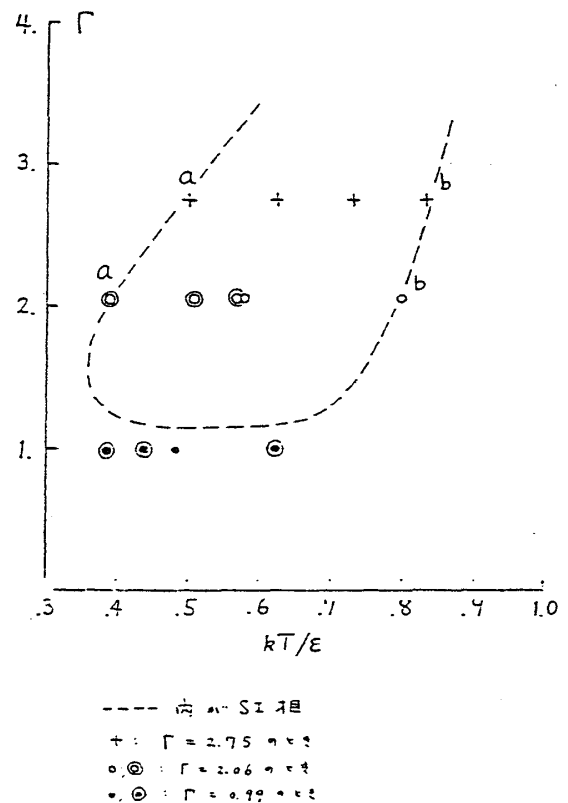


図 10

- (2) (1)のS I相の $\Gamma$ の範囲では種々の量はあまり $\Gamma$ に依存しない。したがって  $\text{Ag}^+$  の拡散係数、1体密度分布は、 $\Gamma$ がこの範囲にあれば、実験結果と主要な点で一致する。また動径分布関数も $\Gamma$ にあまり依存しない。

したがって、AgIのSICとしての特徴はイオン間ポテンシャル(4.1)によって記述できる。そして $\Gamma$ を通じての斥力とクーロン力との均衡がS I相出現の重要な原因となる。また $\epsilon$ ,  $f$ ,  $\sigma_I$ の値を変えたとき、その影響がどう現われるかの見通しも立てやすくなる。この点は、スケール則のないBorn-Mayer型の斥力にない大きな利点である。

## §5 むすび

最近、スーパーコンピューターなる言葉を見聞するようになった。<sup>18, 34)</sup> “スーパー”が適切な表現かどうかは別として、83年秋には東大センターに日立のHAPと仮称されるコンピュータが導入される予定である。これは最大速度がCray-1の2倍程度を目標にしている。実現すれば、現在のM200Hの数10倍の速度である。また富士通もM200の50-100倍の速度の計算機を84年初めに稼働させる目標と聞いている。いずれも並列処理を行って高速化しようとするもので、利用者のプログラムの如何によって計算速度はまちまちであり、目標値はその上限を指すものとみられるが、平均的に少くとも1桁高速化することはまず確実であろう。すなわち、84年には大型センターに現在の計算機より1桁は速いものが設置される状況にある。京大センターはF230-60からM200まで13年間で約15倍にスピードアップしたが、今度はわずか2年間で同程度のアップが行われることになる。これは大きな変化であって、表2の $N=256$ の固体電解質も、予算的裏付けがあれば、大型センターにおいても容易に実行できるようになる。この場合の計算量は、もしsoft-core systemのような短距離力ならばデータ点当り、ほぼ $N=4000$ の系に相当するのである。

さて、同じ体系のシミュレーションにおいても、計算量はその起す現象によって、また何をとりあげるかによって大きく変わってくるが、一般に長大計算を必要とする問題は：

- (I) 粒子数を大きくする必要のある問題。転移点の決定、結晶化過程など。
- (II) 時間相関など積分ステップ和を大きくする必要のある問題。
- (III) 多くのデータ点を必要とする問題。相図の概略の決定。

に分けられる。問題によっては(I), (II), (III)が組合ってくる。また力が短距離力か長距離力かにより計算量は格段に異ってくる。分子性単純液体では、求める量が、熱力学量、動径分布関数、構造因子、動的構造因子の順に、粒子数を大きくしなければならない。これまでの例では最大 $N=864$ であった。(I)の問題としては、固液界面のシミュレーションでは $N=1600$ と

したが、液体からの結晶核成長では $N=4000$ ならば結晶核は球状になることがわかった<sup>36)</sup> 固液共存状態を2次元系で実現した例では $N$ は3000前後を用いている<sup>35)</sup> この問題を3次元系で実現させるには、数万個の粒子系が必要であろう。

§4で述べたわれわれの計算機実験は、これまでのところ(Ⅲ)の問題に属するが、得られた相図が粒子数にどの程度依存するのか、まだ明らかではない。この場合に限らず、一般に電荷粒子系の計算は、粒子数をどうとるかより、計算上の制約内で出来ることをやってきたというのが実状である。たとえば、超イオン電導体で重要な電流の時間相関は電荷の中立性と関係して粒子数依存性が大きいし、§3で述べた $N=108$ のイオン系の融解でlong range orderの一見奇妙なくずれ方も粒子数依存との関係が予想される。現在、このような点を押えながら、超イオン導電性とイオン間相互作用の関係、および動イオンの動特性の解明を目的として研究をすすめているところである。

## 文 献

- 1) N. Saito, N. Ooyama, Y. Aizawa and H. Hirooka: Suppl. Prog. Theor. Phys. **45** (1970), 209  
およびそれに引用された早大グループの仕事
- 2) N. Ogita, A. Ueda, T. Matsubara, H. Matsuda and F. Yonezawa: Suppl. J. Phys. Soc. Japan **26** (1969) S145.
- 3) "Physics of Simple Liquids," ed. by Temperley *et al* の第4章, 第5章
- 4) A. Rahman: Phys. Rev. **136A** (1964), 405.
- 5) L. Verlet: Phys. Rev. **159** (1967), 98 およびこれに続く一連の仕事は Hausen と McDonald の "Theory of Simple Liquied" に述べてある
- 6) W. G. Hoover, S. G. Gray and K. W. Johnson: J. Chem. Phys. **55** (1971) 1128.
- 7) 総合報告としては, L. V. Woodcock: *Adv. Molten Salt Chem.* Vol.3 (1975), chap. 1.
- 8) 京大センター広報 Vol. **15**, No. 2 (1982), 68.
- 9) Y. Hiwatari, H. Matsuda, T. Ogawa, N. Ogita and A. Ueda: Prog. Theor. Phys. **52** (1974), 1105.
- 10) A. Ueda, J. Takada and Y. Hiwatari: J. Phys. Soc. Jpn **50** (1981), 307.
- 11) A. Fukumoto, A. Ueda and Y. Hiwatari: submitted to J. Phys. Soc. Jpn.
- 12) M. Tanemura, Y. Hiwatari, H. Matsuda, T. Ogawa, N. Ogita and A. Ueda: Prog. Theor. Phys. **58**, (1977), 1079.
- 13) S. Takeuchi, M. Tanaka, Y. Fukui, M. Watabe and M. Hasegawa: "The Properties of Liquied Metals" (1972) S143.
- 14) 田中実, 福井芳彦, 竹内栄: 日本金属学会誌 **37** (1973), 907.

- 15) T. Naitoh and S. Ono: J. Chem. Phys. **70** (1979), 4515.
- 16) J. P. Hansen and I. R. McDonald: Phys. Rev. **A11** (1975), 2111.
- 17) D. Levesque, L. Verlet and J. K urkij arvi: Phys Rev **A7** (1973), 1690.
- 18) 片岡洋右：分子研研究会「スーパーコンピューターとその分子科学への応用」の報告書, P 36
- 19) W. Dieterich, P. Fulde and I. Peschel: Adv. in Phys. **29** (1980), 527.
- 20) J. B. Boyce and B. A. Huberman: Physics Reports **51** (1979), 189.
- 21) S. Chandra: "*Superionic Solids*," North-Holland Pub. (1981).
- 22) 星埜禎男：日本結晶学会誌 **21** (1979) 239, 固体物理 **16** (1981), 299.
- 23) 金田卓爾, 長尾信：固体物理 **12** (1977), 501.
- 24) A. Rahman: J. Chem. Phys. **65** (1976), 4845.
- 25) G. Jacucci and A. Rahman: J. Chem. Phys. **69** (1978), 4117.
- 26) M. Dixon and M. J. Gillan: J. Phys. C **11** (1978), L165.
- 27) M. Dixon and M. J. Gillan: J. Phys. C **13** (1980), 1901, *ibid* **13** (1980), 1919.
- 28) W. Schowruers: Phys. Rev. Lett. **38** (1977), 1536, Phys. Rev. **B17** (1978), 2057, *ibid* **B21** (1980), 847.
- 29) P. Vashishta and A. Rahman: Phys. Rev. Lett **40** (1978), 1337.
- 30) P. Vashishta and A. Rahman: "*Fast Ion Transport in Solids*," p527, North-Holland Pub. (1979)および Preprint.
- 31) Y. Hiwatari and A. Ueda: J. Phys. Soc. Jpn. **49** (1980), 2129, *ibid* **48** (1980), 766.
- 32) A. Fukumoto, A. Ueda and Y. Hiwatari: Solid State Ionics **3/4** (1981), 115.
- 33) A. Fukumoto, A. Ueda and Y. Hiwatari: J. Phys. Soc. Jpn. ( 投稿中 )
- 34) R.D. レビン：スーパーコンピューター, サイエンス 1982年3月号
- 35) Swol, Woodcock and Cape: J. Chem. Phys. **73** (1980) 913.
- 36) 種村正美, 樋渡保秋, 小川泰, 荻田直史, 松田博嗣, 上田顕：物理学会分科会 1978年10月